

Fig. 1

E10518\_010\_HCl\_ccorrette  
STANDARD 1H OBSERVE

pad=4.5 run with findz0 before acquisition

Archive directory: PC:network places/Share on Grignard/Computers/NMR\_DATA  
Automation date: autol\_04Mar2004

Pulse Sequence: s2pul

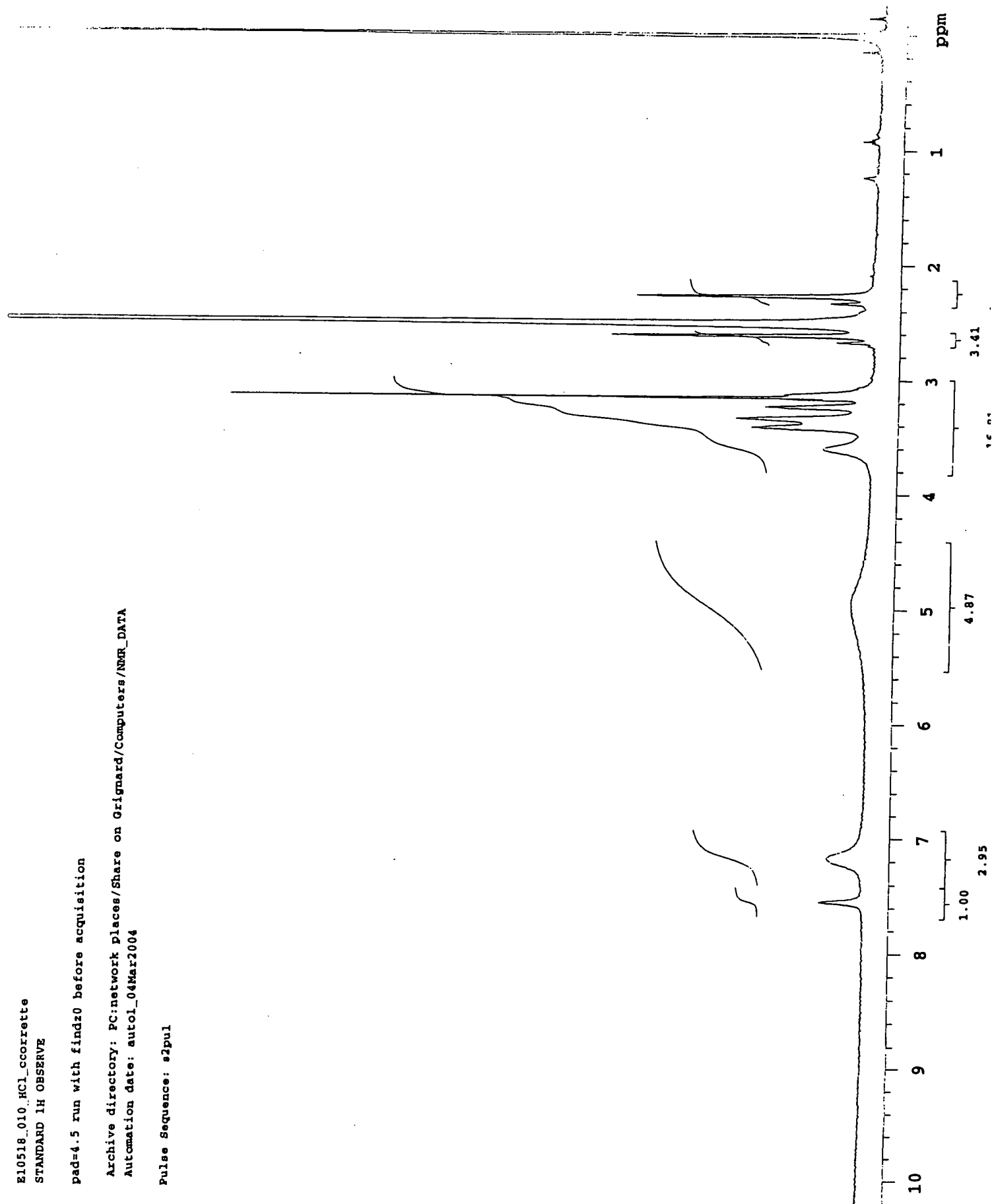
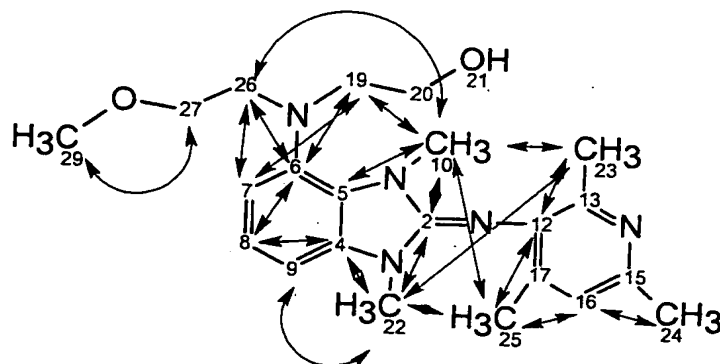


Table-1.:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -chemical shifts of B10518-10-HCL



↔ NOE

→ long range coupling

in DMSO at 50°C

|                    | $\delta ^1\text{H}$ | multiplicity | J(Hz)   | $\delta ^{13}\text{C}$ |
|--------------------|---------------------|--------------|---------|------------------------|
| 2-C                |                     |              |         | *147.63                |
| 4-C                |                     |              |         | 132.28                 |
| 5-C                |                     |              |         | 125.40                 |
| 6-C                |                     |              |         | 136.95                 |
| 7-CH               | *7.32~7.15          |              |         | 119.29                 |
| 8-CH               | *7.32~7.15          |              |         | 123.36                 |
| 9-CH               | *7.32~7.15          |              |         | 105.79                 |
| 10-CH <sub>3</sub> | 3.706               |              |         | 31.96                  |
| 12-C               |                     |              |         | 135.13                 |
| 13-C               |                     |              |         | 146.30                 |
| 15-C               |                     |              |         | *147.63                |
| 16-CH              | 7.591               | s            |         | 125.89                 |
| 17-C               |                     |              |         | 149.85                 |
| 19-CH <sub>2</sub> | 3.149               | m            |         | 56.72                  |
| 20-CH <sub>2</sub> | 3.440               | m            |         | 58.11                  |
| 22-CH <sub>3</sub> | 3.465               | s            |         | 30.30                  |
| 23-CH <sub>3</sub> | 2.637               | s            |         | 14.44                  |
| 24-CH <sub>3</sub> | 2.685               | s            |         | *218.43                |
| 25-CH <sub>3</sub> | 2.320               | s            |         | *218.33                |
| 26-CH <sub>2</sub> | 3.249               | t            | 5.9 5.4 | 53.39                  |
| 27-CH <sub>2</sub> | 3.362               | t            | 5.9 5.4 | 69.26                  |
| 29-CH <sub>3</sub> | 3.161               | s            |         | 57.55                  |

\*, \* 1, \* 2 couldn't be assigned due to overlapping of the peaks.

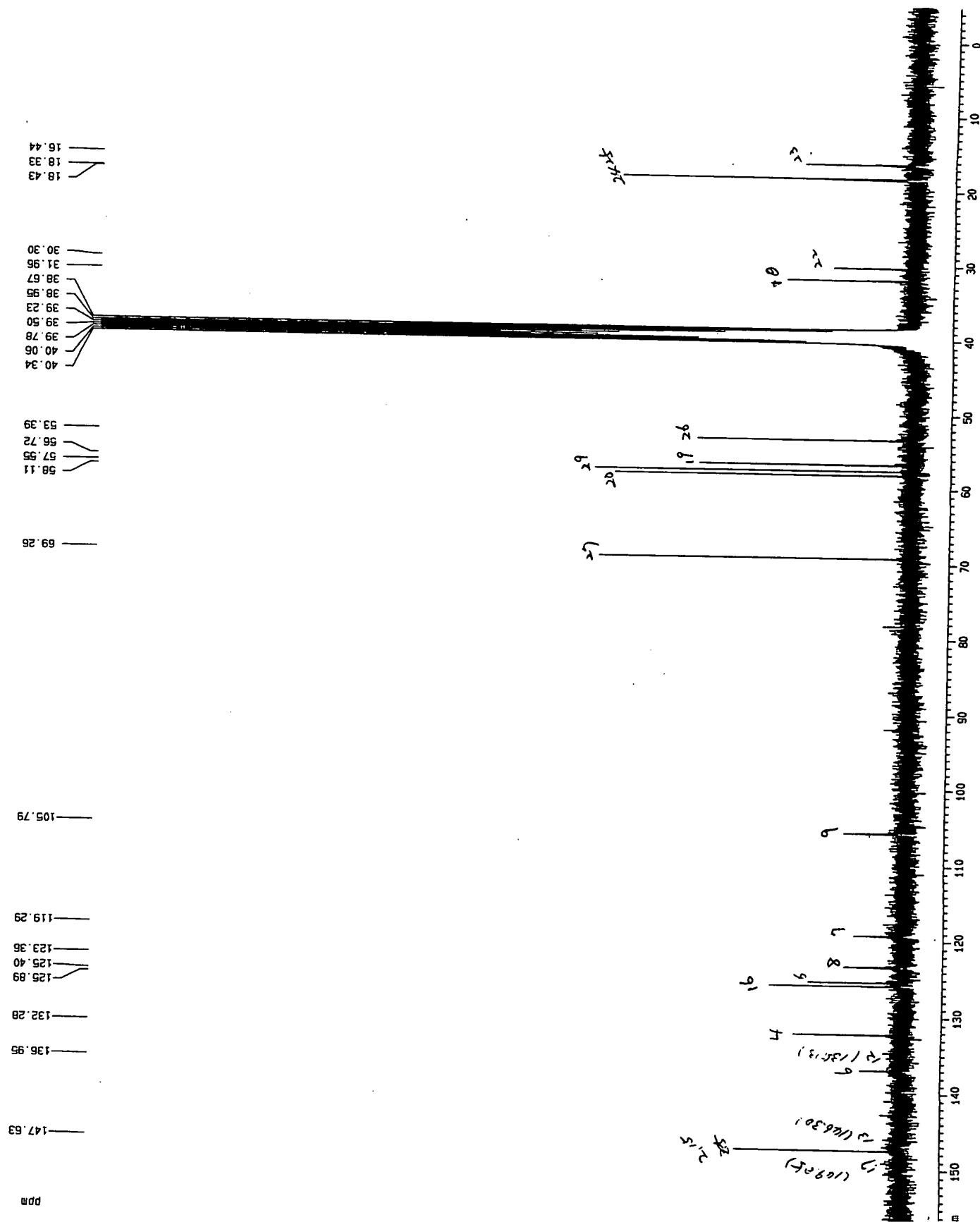
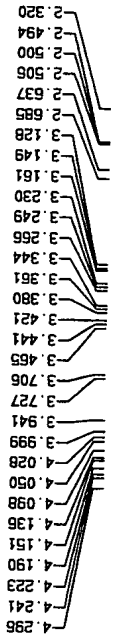
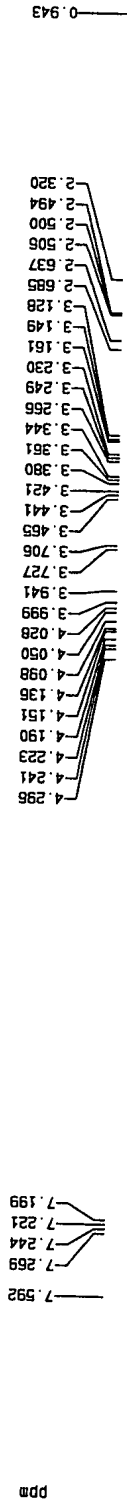


Fig. 3



Current Data Parameters  
NAME 810518-10-HCl  
EXPNO 1  
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date\_ 20040325  
Time 12.58  
INSTRUM dpx300  
PROBHD 5 mm QNP 1H  
PULPROG zgpg30  
TD 32768  
SOLVENT DMSO  
NS 32  
DS 4  
SWH 2705.628 Hz  
FIDRES 0.082559 Hz  
AQ 6.0935763 sec  
RG 256  
DM 184.800 usec  
DE 6.00 usec  
TE 300.0 K  
D1 2.00000000 sec  
P0 3.00 usec  
SFO1 300.1312430 MHz  
NUC1 1H  
PL1 -5.00 dB

F2 - Processing parameters

SI 16384  
SF 300.1300011 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.10 Hz  
GB 0  
PC 1.00

1D NMR plot parameters  
CX 34.00 cm  
FIP 8.645 ppm  
F1 2594.76 Hz  
F2P -0.369 ppm  
F2 -110.87 Hz  
PPMCH 0.26514 ppm/cm  
HZCH 79.57729 Hz/cm

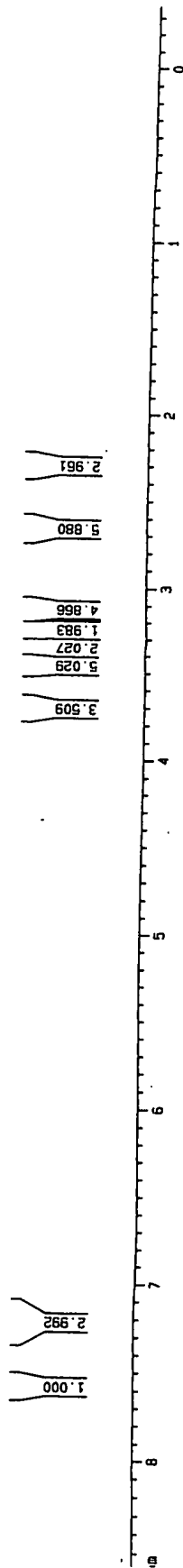
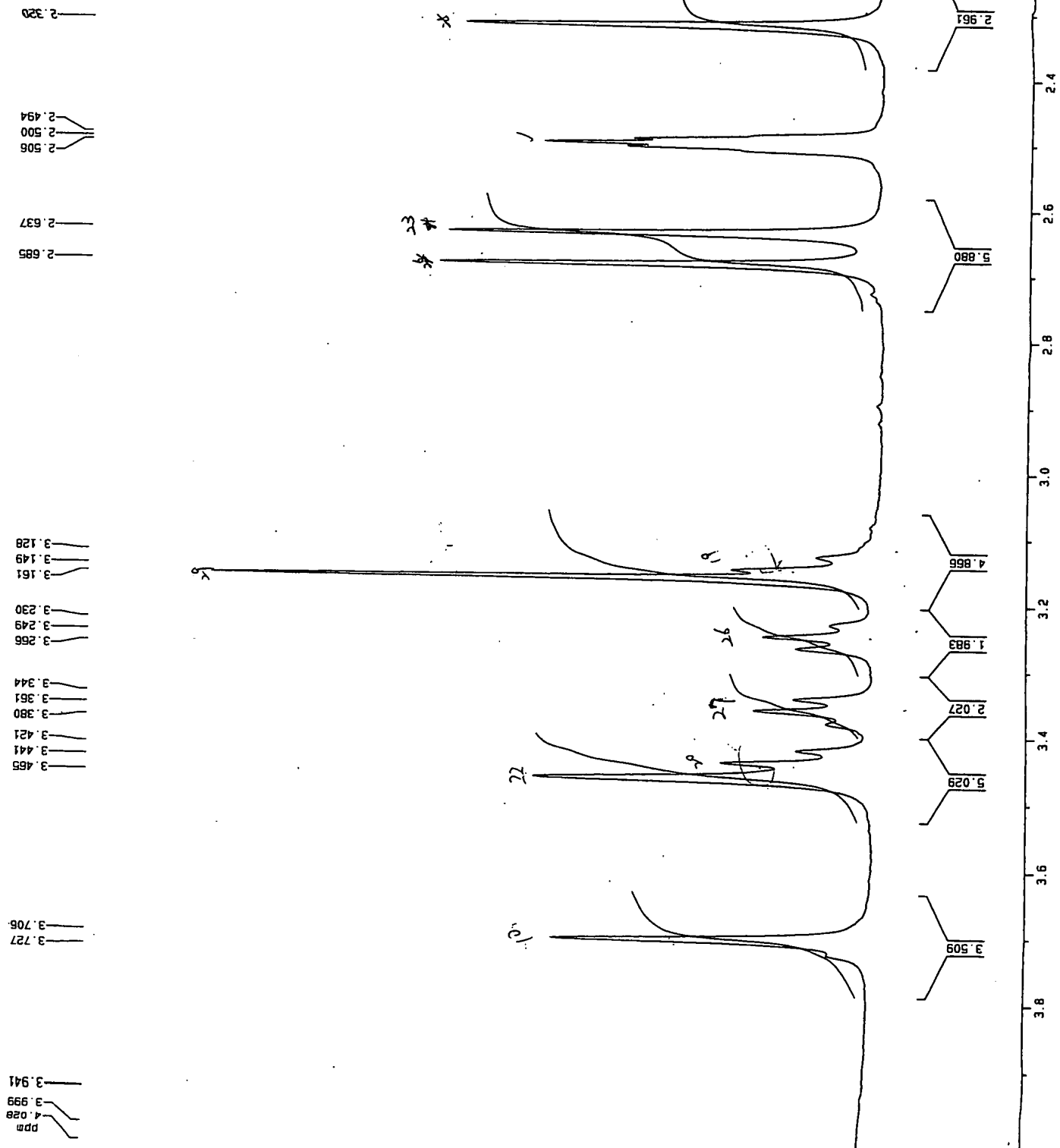


Fig. 4



Current Data Parameters  
NAME 810518-10-HC1  
EXPNO 1  
PROCNO 1

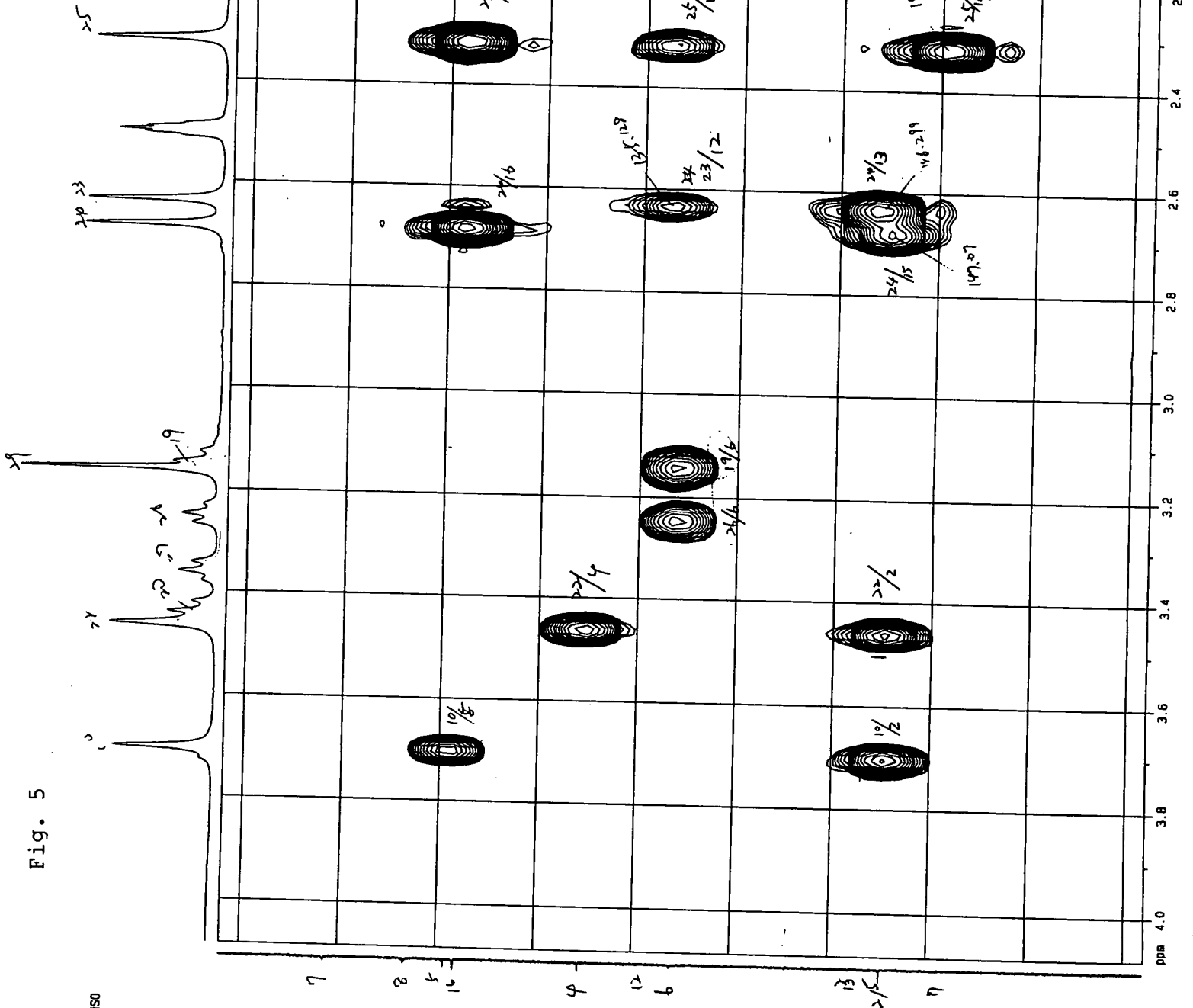
F2 - Acquisition Parameters  
Date\_ 20040325  
Time 12:58  
INSTRUM dpx300  
PROBHD 5 mm QNP 1H  
PULPROG zgpg  
TD 32768  
SOLVENT DMSO  
NS 32  
DS 4  
SWH 2705.628 Hz  
FIDRES 0.082569 Hz  
AQ 6.0555763 sec  
RG 256  
DW 184.800 usec  
DE 6.00 usec  
TE 300.0 K  
D1 2.00000000 sec  
P0 3.00 usec  
SF01 300.1312430 MHz  
NUC1 1H  
PL1 -5.00 dB

F2 - Processing parameters  
SI 16384  
SF 300.1300011 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.10 Hz  
GB 0  
PC 1.00

1D NMR plot parameters  
CX 34.00 cm  
F1P 4.029 ppm  
F1 1209.34 Hz  
F2P 2.033 ppm  
F2 610.18 Hz  
PPM0 0.05872 ppm/cm  
HZ0 17.62256 Hz/cm

Fig. 5

B10518-10-HC1 in DMSO  
HMBC



Current Data Parameters  
NAME B10518-10-HC1  
EXPNO 5  
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters  
Date\_ 20040326  
Time 4.00  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm QNP 1H  
PULPROG zgpg30  
TD 1024  
SOLVENT DMSO  
NS 56  
DS 16  
SWH 2705.628 Hz  
FIDRES 2.642215 Hz  
AQ 0.1892862 sec  
RG 32768  
DM 184.800 usec  
DE 6.00 usec  
TE 300.0 K  
P1 8.20 usec  
P2 16.40 usec  
D0 0.0000300 sec  
CHST2 145.0000000  
d2 0.0034828 sec  
d13 0.0000300 sec  
D1 2.0000000 sec  
SF01 300.1312430 MHz  
NUC1 1H  
PL1 -5.00 dB  
P3 5.80 usec  
SF02 75.475258 MHz  
NUC2 13C  
PL2 -6.00 dB  
D6 0.0600000 sec  
P16 1000.00 usec  
D16 0.0020000 sec  
INO 0.0003080 sec

F1 - Acquisition Parameters  
NDO 2  
TO 188  
SF01 75.47527 MHz  
FIDRES 86.346823 Hz  
SW 215.087 pps

F2 - Processing parameters  
SI 1024  
SF 300.1300011 MHz  
WDW SINE  
SSB 0  
LB 0.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40

F1 - Processing parameters  
SI 256  
SF 75.4678052 MHz  
WDW SINE  
SSB 0  
LB 0.00 Hz  
GB 0

2D NMR plot parameters  
CX2 28.00 ca  
CX1 22.00 ca  
F2P10 4.085 pps  
F2L0 1226.09 Hz  
F2P11 1.984 pps  
F2L1 589.31 Hz  
F1P10 161.037 pps  
F1L0 12153.09 Hz  
F1P11 113.982 pps  
F1L1 8601.95 Hz  
F2P10N 0.07577 pps/ca  
F2L0N 22.74192 Hz/ca  
F1P10N 2.13688 pps/ca  
F1L1N 113.982 pps/ca

Fig. 6

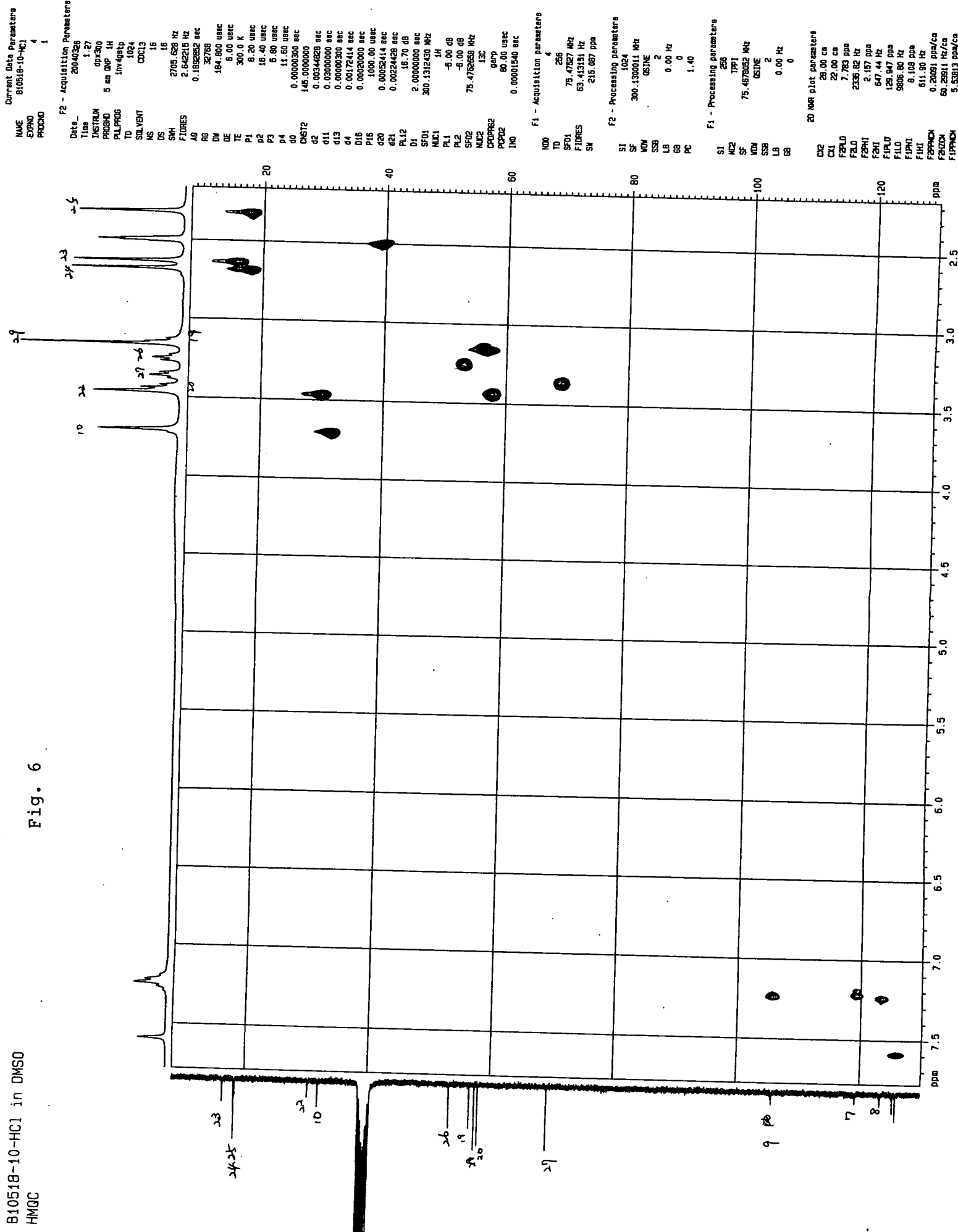
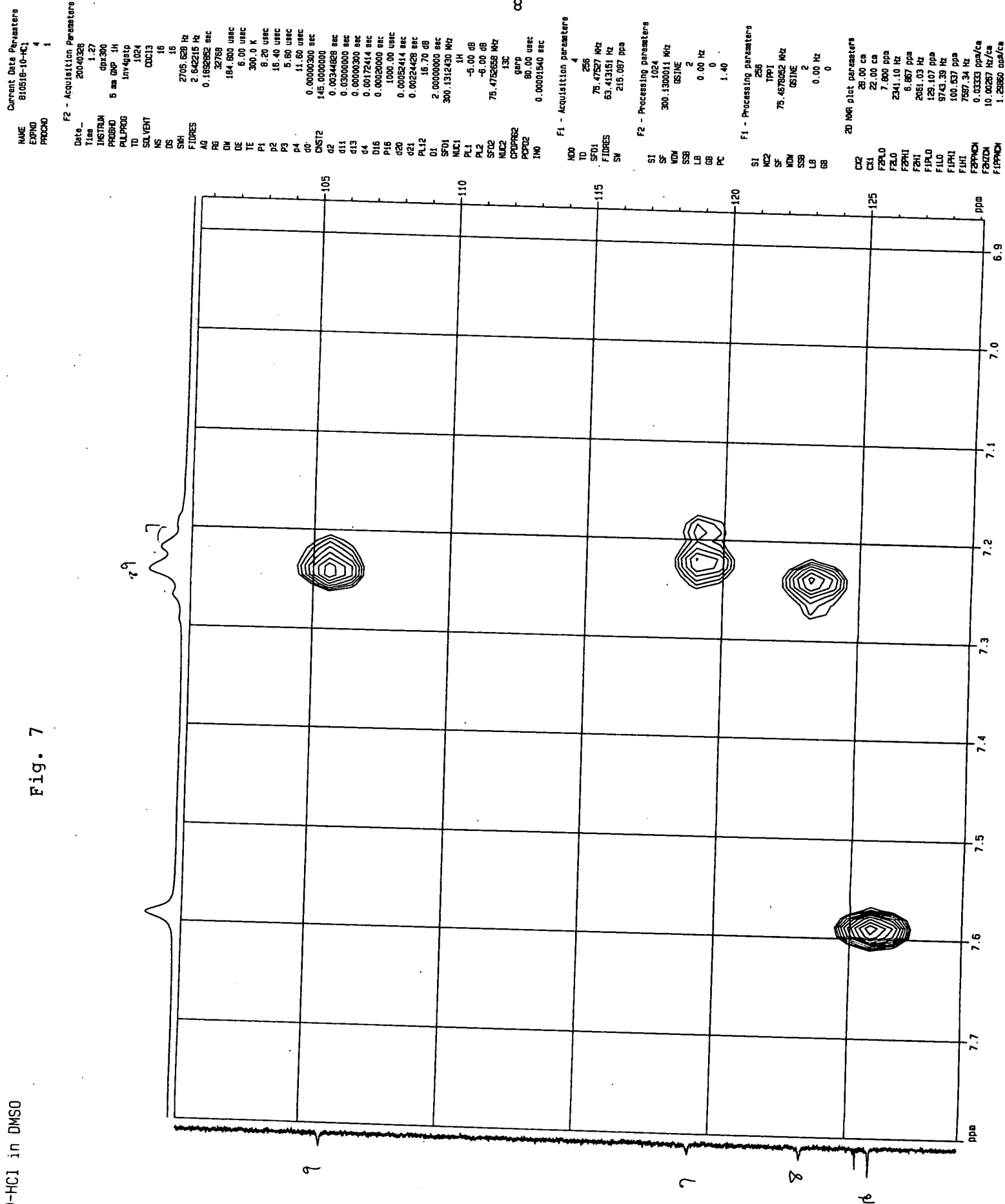


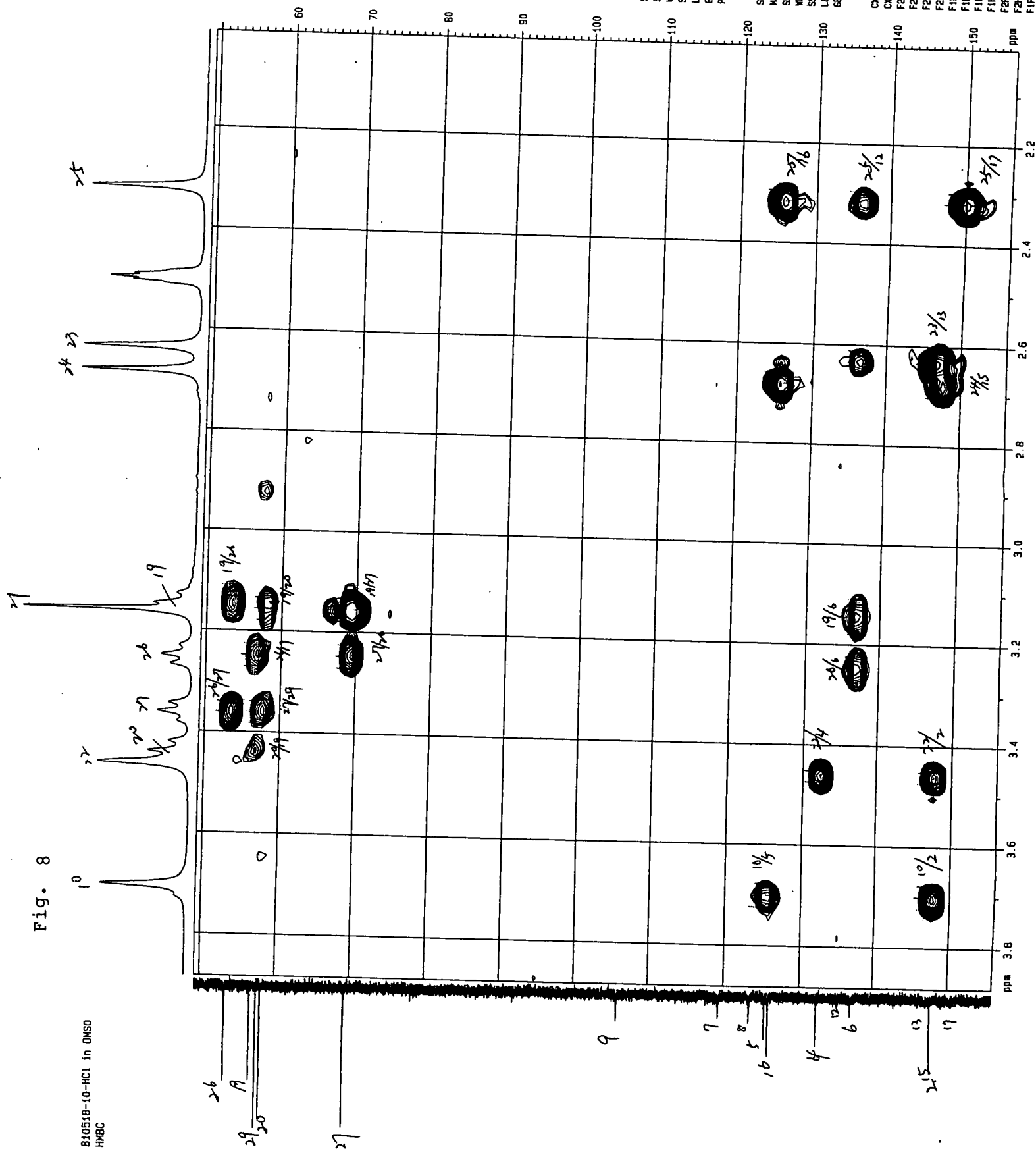
Fig. 7





**B10518-10-HCl in DMSO**  
**HMBC**

Fig. 8





## F2 - Acquisition Parameters

| Date_ | Time | INSTRUM | PROBHD | 5 mm GMP | 1H | 13C | 15N | 17O | 19F | 23Na | 25Mg | 29Si | 31P | 33S | 35Cl | 37Cl | 41K | 43Ca | 45Sc | 47Ti | 51V | 53Cr | 55Mn | 59Co | 63Cu | 65Cu | 67Zn | 69Ga | 71Ga | 73Ge | 75Ge | 77Se | 79Br | 81Br | 83Kr | 85Kr | 87Kr | 89Y | 91Zr | 93Zr | 95Zr | 97Zr | 101Mo | 103Mo | 105Mo | 107Pd | 109Pd | 111Pd | 113Cd | 115Cd | 117Cd | 119Cd | 121Sn | 123Sn | 125Sn | 127Sn | 129Xe | 131Xe | 133Xe | 135Xe | 137Xe | 139La | 141La | 143La | 145La | 147La | 149La | 151La | 153La | 155La | 157La | 159La | 161La | 163La | 165La | 167La | 169La | 171La | 173La | 175La | 177La | 179La | 181La | 183La | 185La | 187La | 189La | 191La | 193La | 195La | 197La | 199La | 201La | 203La | 205La | 207La | 209La | 211La | 213La | 215La | 217La | 219La | 221La | 223La | 225La | 227La | 229La | 231La | 233La | 235La | 237La | 239La | 241La | 243La | 245La | 247La | 249La | 251La | 253La | 255La | 257La | 259La | 261La | 263La | 265La | 267La | 269La | 271La | 273La | 275La | 277La | 279La | 281La | 283La | 285La | 287La | 289La | 291La | 293La | 295La | 297La | 299La | 301La | 303La | 305La | 307La | 309La | 311La | 313La | 315La | 317La | 319La | 321La | 323La | 325La | 327La | 329La | 331La | 333La | 335La | 337La | 339La | 341La | 343La | 345La | 347La | 349La | 351La | 353La | 355La | 357La | 359La | 361La | 363La | 365La | 367La | 369La | 371La | 373La | 375La | 377La | 379La | 381La | 383La | 385La | 387La | 389La | 391La | 393La | 395La | 397La | 399La | 401La | 403La | 405La | 407La | 409La | 411La | 413La | 415La | 417La | 419La | 421La | 423La | 425La | 427La | 429La | 431La | 433La | 435La | 437La | 439La | 441La | 443La | 445La | 447La | 449La | 451La | 453La | 455La | 457La | 459La | 461La | 463La | 465La | 467La | 469La | 471La | 473La | 475La | 477La | 479La | 481La | 483La | 485La | 487La | 489La | 491La | 493La | 495La | 497La | 499La | 501La | 503La | 505La | 507La | 509La | 511La | 513La | 515La | 517La | 519La | 521La | 523La | 525La | 527La | 529La | 531La | 533La | 535La | 537La | 539La | 541La | 543La | 545La | 547La | 549La | 551La | 553La | 555La | 557La | 559La | 561La | 563La | 565La | 567La | 569La | 571La | 573La | 575La | 577La | 579La | 581La | 583La | 585La | 587La | 589La | 591La | 593La | 595La | 597La | 599La | 601La | 603La | 605La | 607La | 609La | 611La | 613La | 615La | 617La | 619La | 621La | 623La | 625La | 627La | 629La | 631La | 633La | 635La | 637La | 639La | 641La | 643La | 645La | 647La | 649La | 651La | 653La | 655La | 657La | 659La | 661La | 663La | 665La | 667La | 669La | 671La | 673La | 675La | 677La | 679La | 681La | 683La | 685La | 687La | 689La | 691La | 693La | 695La | 697La | 699La | 701La | 703La | 705La | 707La | 709La | 711La | 713La | 715La | 717La | 719La | 721La | 723La | 725La | 727La | 729La | 731La | 733La | 735La | 737La | 739La | 741La | 743La | 745La | 747La | 749La | 751La | 753La | 755La | 757La | 759La | 761La | 763La | 765La | 767La | 769La | 771La | 773La | 775La | 777La | 779La | 781La | 783La | 785La | 787La | 789La | 791La | 793La | 795La | 797La | 799La | 801La | 803La | 805La | 807La | 809La | 811La | 813La | 815La | 817La | 819La | 821La | 823La | 825La | 827La | 829La | 831La | 833La | 835La | 837La | 839La | 841La | 843La | 845La | 847La | 849La | 851La | 853La | 855La | 857La | 859La | 861La | 863La | 865La | 867La | 869La | 871La | 873La | 875La | 877La | 879La | 881La | 883La | 885La | 887La | 889La | 891La | 893La | 895La | 897La | 899La | 901La | 903La | 905La | 907La | 909La | 911La | 913La | 915La | 917La | 919La | 921La | 923La | 925La | 927La | 929La |  |
|-------|------|---------|--------|----------|----|-----|-----|-----|-----|------|------|------|-----|-----|------|------|-----|------|------|------|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-----|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
|-------|------|---------|--------|----------|----|-----|-----|-----|-----|------|------|------|-----|-----|------|------|-----|------|------|------|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-----|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--|

## **.F1 - Acquisition parameters**

|        |              |
|--------|--------------|
| ND00   | 2            |
| TD     | 188          |
| SF01   | 75.47527 MHz |
| FI0RES | 86.349823 Hz |
| SW     | 215.087 ppb  |

## F2 - Processing parameters

| SI  | 1024            |
|-----|-----------------|
| SF  | 300.1300011 MHz |
| WOW | SINE            |
| SSB | 0               |
| LB  | 0.00 Hz         |
| GB  | 0               |
| PC  | 1.40            |

### F1 - Processing parameters

| SI  | 255            |  |
|-----|----------------|--|
| MC2 | OF             |  |
| SF  | 75.4678052 MHz |  |
| NOW | SINE           |  |
| SSB | 0              |  |
| LB  | 0.00 Hz        |  |
| GB  | 0              |  |

20 NDR plot parameters

| CU MMH plot parameters | CU MMH plot parameters |
|------------------------|------------------------|
| CX2                    | 28.00 ca               |
| CX1                    | 22.00 ca               |
| F2PLO                  | 8.161 ppm              |
| F2LO                   | 2449.43 Hz             |
| F2PHI                  | 1.823 ppm              |
| F2HI                   | 547.04 Hz              |
| F1PLO                  | 158.516 ppm            |
| F1LO                   | 11962.85 Hz            |
| F1PHI                  | 8.948 ppm              |
| F1HI                   | 675.31 Hz              |
| F2PHI                  | 0.22638 ppm            |
| F2HI                   | 67.94266 Hz            |
| F1PHI                  | 6.79853 ppm            |
| F1HI                   | 513.07001 Hz           |

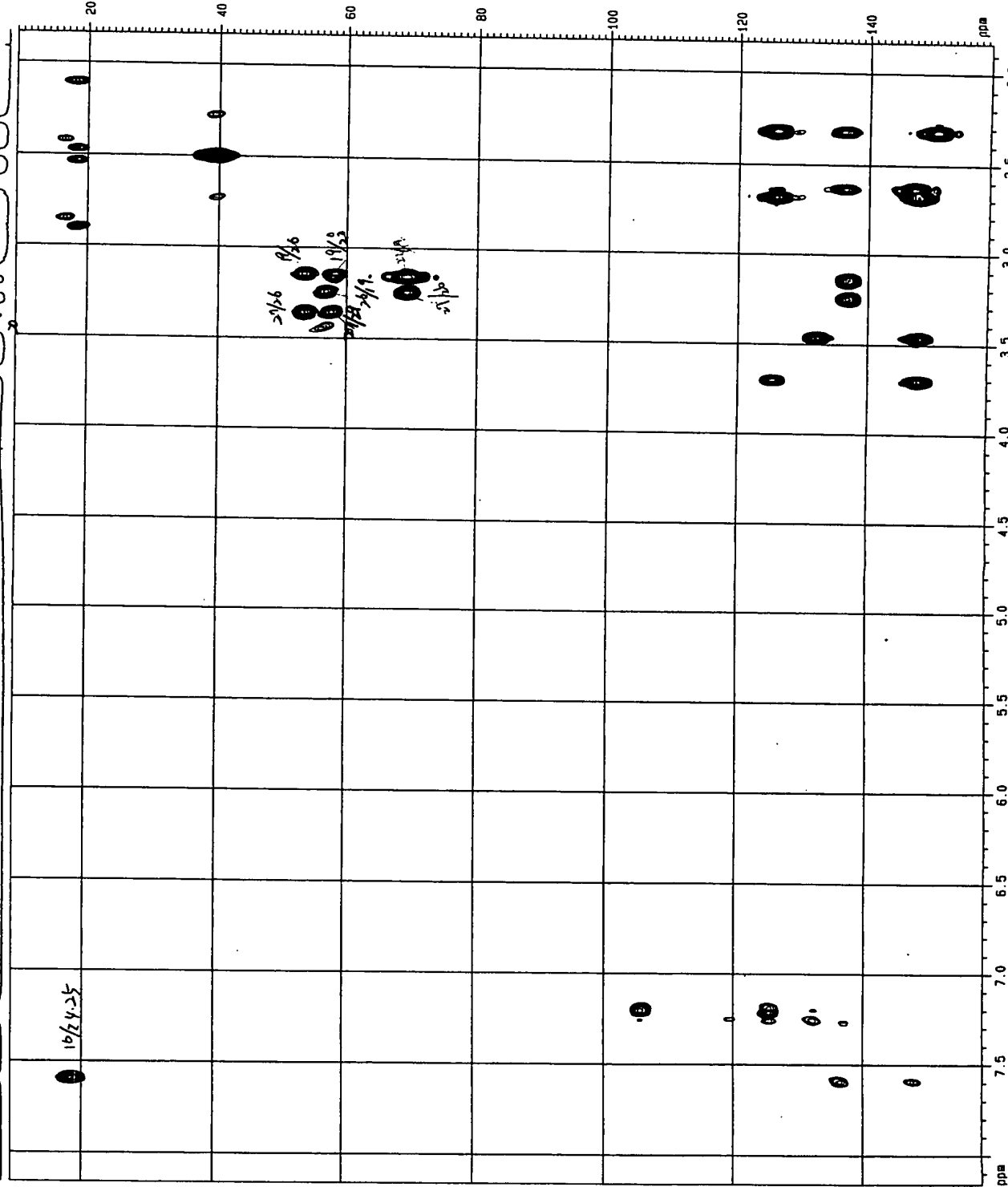
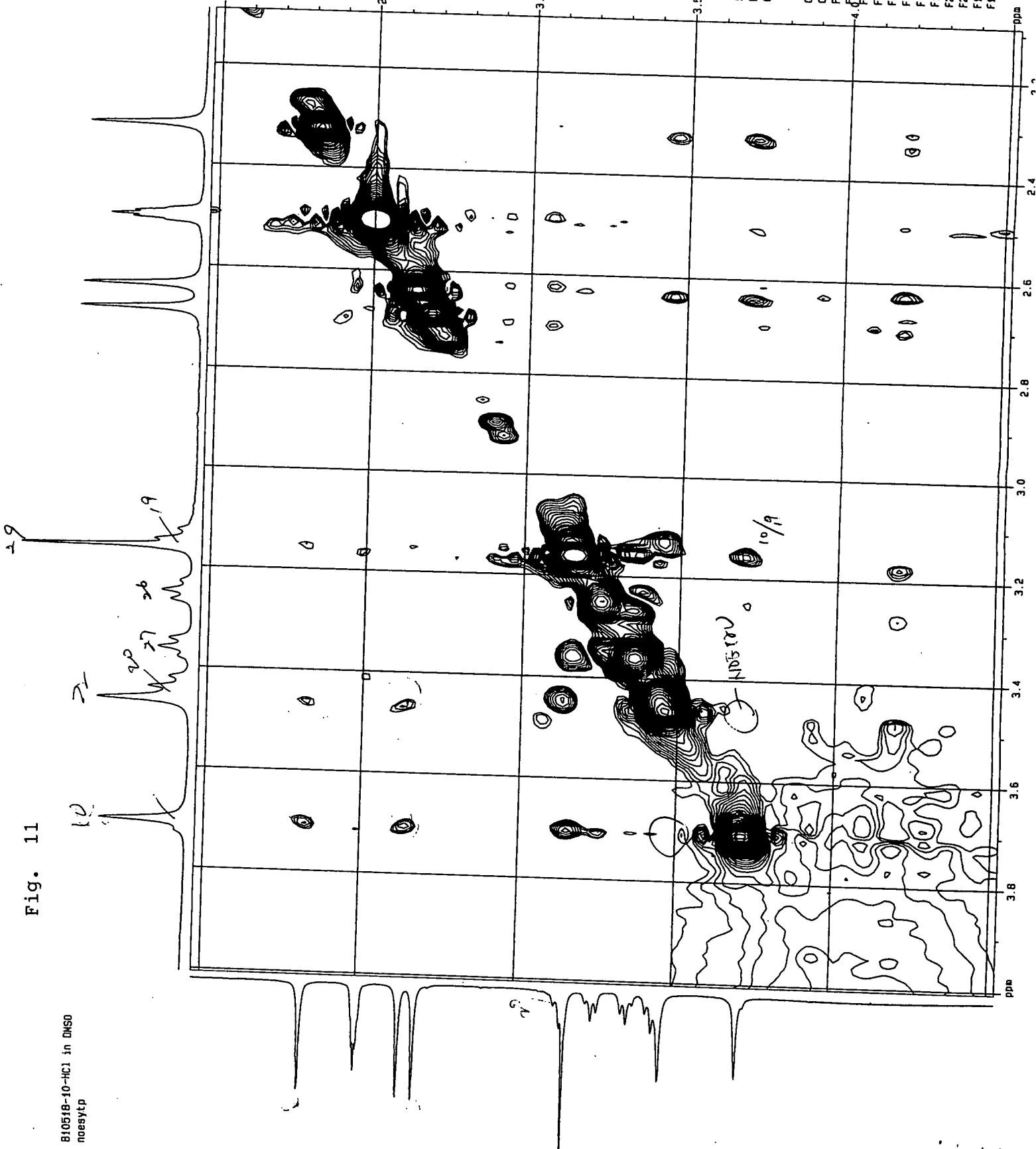


Fig. 10

Fig. 11

810518-10-HC1 in DMSO  
noesytp



Current Data Parameters  
NAME 810518-10-HC1  
EXPNO 2  
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date\_ 20040325  
Time 13.09  
INSTRUM dpx300  
PROBHD 5 mm QNP 1H  
PULPROG noesytp  
TD 1024  
SOLVENT CDC13  
NS 24  
DS 8

2705.628 Hz  
2.642215 Hz  
0.1892852 sec  
256  
184.800 usec  
6.00 usec  
300.0 K  
0.00000300 sec  
2.00000000 sec  
8.20 usec  
300.1312430 MHz  
-5.00 dB  
0.80000001 sec  
0.00018480 sec

F1 - Acquisition Parameters

ND00 2  
TO 256  
SF01 300.1312 MHz  
FIDRES 10.568858 Hz  
SW 9.015 ppm

F2 - Processing parameters

SI 1024  
SF 300.1300011 MHz  
WDW USINE  
SSB 2  
LB 0.00 Hz  
GB 0  
PC 1.00

F1 - Processing parameters

SI 512  
TPP1  
SF 300.1300011 MHz  
WDW USINE  
SSB 2  
LB 0.00 Hz  
GB 0

2D NMR plot parameters

CX2 26.50 cm  
CX1 22.00 cm  
F2PLO 4.006 ppm  
F2PHI 1202.31 Hz  
F2H1 2.087 ppm  
F1PLO 626.30 Hz  
F1LO 4.525 ppm  
F1PHI 1358.20 Hz  
F1H1 1.972 ppm  
F2PPHCH 591.96 Hz  
F2HZCH 0.06734 ppm/cm  
F1PPHCH 20.21062 Hz/cm  
F1HZCH 0.11605 ppm/cm  
34.82919 Hz/cm

Fig. 12

Current Data Parameters  
NAME 810518-10-HC1  
EXPNO 2  
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date\_ 20040325  
Time 13.09  
INSTRUM dpx300  
PROBHD 5 mm QNP 1H  
PULPROG noesytp  
TD 1024  
SOLVENT CDCl3  
NS 24  
DS 8  
SWH 2705.628 Hz  
FIDRES 2.642115 Hz  
AQ 0.1692952 sec  
RG 256  
DM 184.800 usec  
DE 6.00 usec  
TE 300.0 K  
d0 0.0000300 sec  
d1 2.0000000 sec  
P1 8.20 usec  
SFO1 300.131230 MHz  
NUC1 1H  
PL1 -5.00 dB  
DB 0.8000001 sec  
IN0 0.00018480 sec

F1 - Acquisition parameters

ND0 2  
TD 256  
SFO1 300.1312 MHz  
FIDRES 10.568958 Hz  
SW 9.015 ppm

F2 - Processing parameters

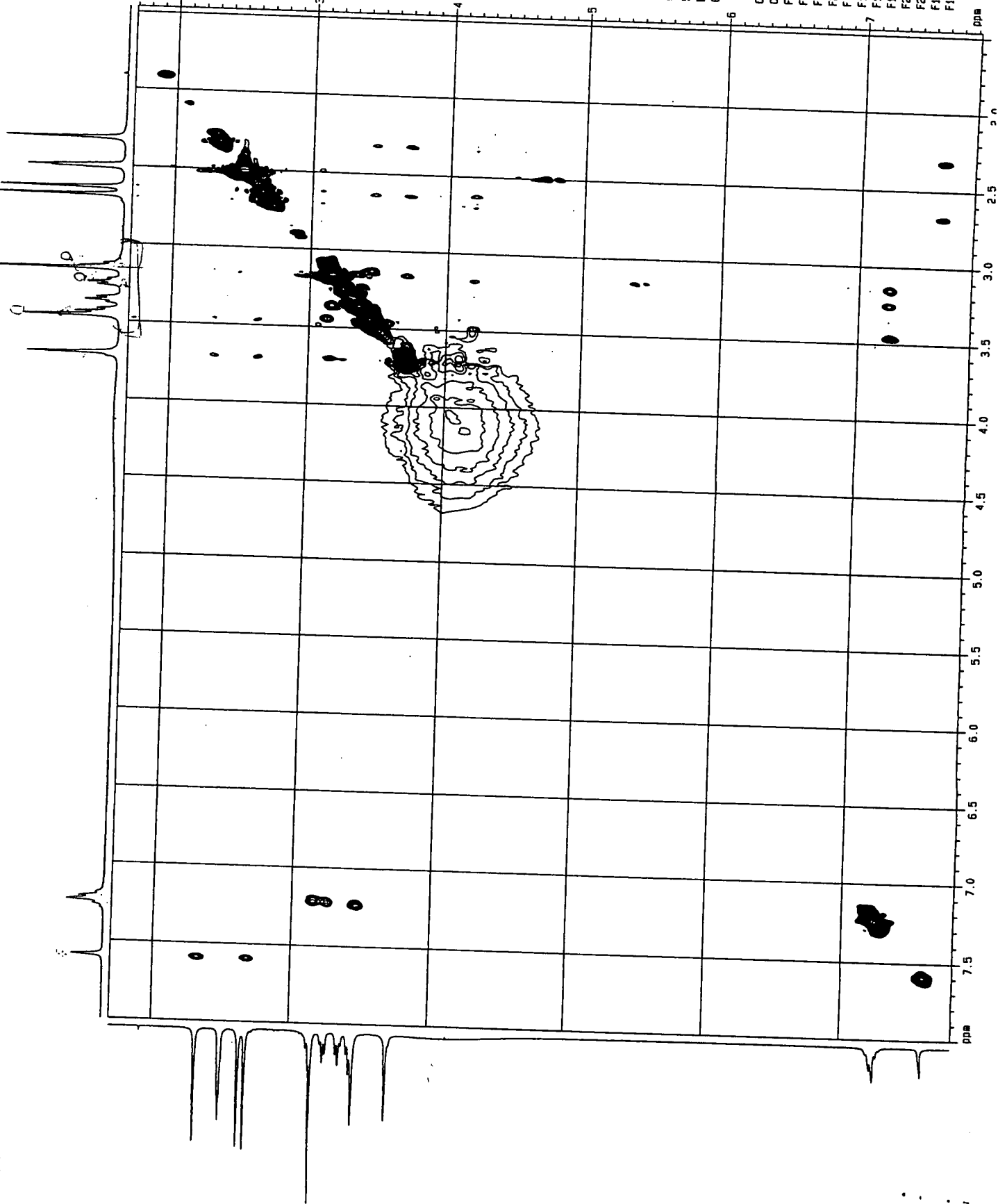
SI 1024  
SF 300.1300011 MHz  
WDW GSIINE  
SSB 2  
LB 0.00 Hz  
GB 0  
PC 1.00

F1 - Processing parameters

SI 512  
MC2 TPPI  
SF 300.1300011 MHz  
WDW GSIINE  
SSB 2  
LB 0.00 Hz  
GB 0

2D NMR plot parameters

CX2 28.50 cm  
CX1 22.00 cm  
F2PL0 8.003 ppm  
F2L0 2401.87 Hz  
F2PHI 1.462 ppm  
F2H1 438.71 Hz  
F1PL0 7.819 ppm  
F1L0 2346.39 Hz  
F1PHI 1.691 ppm  
F1H1 507.40 Hz  
F2PPACK 0.22951 ppm/cm  
F2HZCM 68.88300 Hz/cm  
F1PPACK 0.27851 ppm/cm  
F1HZCM 83.59007 Hz/cm



810518-10-HC1 in DMSO  
noesytp